

Title	可逆セルオートマトンの統計力学と動力学(モレキュール「多自由度の力学系と幾何学」,研究会報告)
Author(s)	武末, 真二
Citation	物性研究 (1995), 64(4): 472-479
Issue Date	1995-07-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/95553
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

可逆セルオートマトンの統計力学と動力学

京都大学総合人間学部 武末真二

1 序

本稿では、力学系に対する幾何学的見方という本研究会の主題からひとまず離れ、大自由度系の測度論的性質、それも統計力学の基礎というボルツマン以来の問題について考えてみたい。扱う系としては、ギブス流の統計力学の議論ができる系で、しかもなるべく構造が簡単で系統的な取り扱いができるものという理由から、可逆セルオートマトンの族を選んだ。具体的な現象としては熱輸送を取り扱い、フーリエ則のような拡散的挙動が現われ、熱伝導率に対する久保公式が成立するためには、どのような条件が必要であるかということを中心に考える。拡散を示す力学モデルとしては、他に田崎 [1, 2] らによる結合写像系や、蕪木、町田 [3] によるハミルトン力学系の例がある。それらと比較した場合、セルオートマトンは、(i) 時間・空間・状態のすべてが離散的なモデルであり、その上で統計力学の議論を行なうことができる、(ii) シミュレーションを行なう場合、ハミルトン系のような数値誤差がなく、しかも計算時間が比較的少なくすむ、という特徴を持つ。したがって、統計力学の基礎を考える上でのプロトタイプとなりうるものであると考えている。研究会で議論のあった、エントロピーの増大についての数値計算の予備的結果について、最後に触れてみたい。

2 モデル

我々が用いるモデルは、ERCA (Elementary Reversible Cellular Automata) と呼ぶ次のような可逆セルオートマトンの族である。すなわち、ERCA とは、各格子点 i に値 0, 1 を取る変数が 2 個 ($\sigma_i, \hat{\sigma}_i$ と表す) 属しており、それらの時間発展規則が次式で表される力学系をいう。

$$\sigma_i^{t+1} = f(\sigma_{i-1}^t, \sigma_i^t, \sigma_{i+1}^t) \oplus \hat{\sigma}_i^t \quad (1)$$

$$\hat{\sigma}_i^{t+1} = \sigma_i^t \quad (2)$$

ここで時刻 t は整数値を取り、 f は 0, 1 の値を取る 3 変数関数である。また \oplus は、 $1 \oplus 1 = 0 \oplus 0 = 0$ 、 $0 \oplus 1 = 1 \oplus 0 = 1$ で定義される排他的論理和と呼ばれる 2 項演算を表す。この系が時間反転対称性を持つことは、式の形から明らかであろう。場合によっては、簡便のために $x_i^t = (\sigma_i^t, \hat{\sigma}_i^t)$ とし、式 (1)、(2) をまとめて

$$x_i^{t+1} = g(x_{i-1}^t, x_i^t, x_{i+1}^t) \quad (3)$$

のように表すことにする。関数 f を与えることにより系の時間発展則 (ルール) が決定される。それぞれのルールを区別するために、関数 f で与えられるルールに対し、一意的に対応する数字

$$\sum_{a=0}^1 \sum_{b=0}^1 \sum_{c=0}^1 f(a, b, c) 2^{4a+2b+c}$$

に「可逆」を表す R をつけて「ルール 26R」などと呼ぶ。ルール 0R からルール 255R までの 256 個のルールが存在するが、左右反転対称性と 0 と 1 の入れ替えの対称性で分類すると、本質的に異なるルールは 88 個である。

3 加法的保存量

ERCA の各ルールに対し、次の形の保存量が存在するかどうかを考えよう。

$$F(x_i^{t+1}, x_{i+1}^{t+1}, \dots, x_{i+\alpha}^{t+1}) = F(x_i^t, x_{i+1}^t, \dots, x_{i+\alpha}^t) + J(x_{i-1}^t, \dots, x_{i+\alpha}^t) - J(x_i^t, \dots, x_{i+\alpha+1}^t) \quad (4)$$

ここで α は与えられた自然数とする。上式は連続の式を離散化したものとみなせるから、適当な関数 F, J を与えたとき、任意の $x_{i-1}^t, x_i^t, \dots, x_{i+\alpha+1}^t$ に対して上式が成立するならば、 F を加法的保存量の密度、 J をその流れを表すものと解釈することができる。さらにこのような保存量が存在する場合、周期境界条件のもとでの和

$$\mathcal{H}_N(\{x_i\}) = \sum_{i=0}^{N-1} F(x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+\alpha})$$

を（統計力学の意味における）ハミルトニアンと考えて、通常の平衡統計力学の議論を行なうことができる。すなわち、物理量 $A(\{x_i\})$ の温度 β^{-1} の平衡系におけるアンサンブル平均は

$$\langle A \rangle_{eq} = \frac{\sum_{\{x_i\}} A(\{x_i\}) e^{-\beta \mathcal{H}_N(\{x_i\})}}{\sum_{\{x_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}_N(\{x_i\})}}$$

で与えられる。これにより、例えば温度が格子点あたりの平均エネルギー $\phi = \langle F \rangle_{eq}$ の関数として求められる。

このような関数 F と J が存在するかどうかはルールによって、また α の値によっても異なる。さらに、このような保存量が存在したとしても、 \mathcal{H}_N のみならず $F(x_i, \dots, x_{i+\alpha})$ 自身が不変量になる（つまり J が恒等的に 0 になる）場合には、統計力学の議論が成り立たないことはいうまでもない。（例えば部分系の保存量がギブス分布を満たすというようなことは期待できない。）そこで、 $\alpha = 1$ の加法的保存量が存在するが、密度関数自身が保存するような量は（ $\alpha = 2, 3$ においても）持たないようなルールを書き出してみると表 1 の 7 個が得られる [4]。また各ルールに対し、 $\alpha = 2, 3$ でそれぞれ何個の保存量が新たに出現するかを求めてみると、表 1 の右の欄のようになる。以下では主として $\alpha = 1$ の保存量に対する統計力学を考え、 $\alpha > 1$ の量はそれに対する影響という形で考慮することにする。

ルール	$\alpha = 1$ 加法的保存量	$\alpha = 2, 3$ 加法的保存量
26R	A	なし
77R	C	2, 0
90R	A, D	2, 4
91R	B, D	1, 0
94R	D	なし
95R	D	1, 2
123R	B, D	なし

表 1：加法的保存量。「 $\alpha = 2, 3$ 保存量」の欄は $\alpha = 2$ および 3 で新たに出現する保存量の個数。

「 $\alpha = 1$ 保存量」の欄の A, B, C, D は保存量の種類を表し、それぞれに対する $F(\sigma, \hat{\sigma}, \nu, \hat{\nu})$ は、

$$A: (\hat{\sigma} - \nu)^2 + (\sigma - \hat{\nu})^2$$

$$B: 1 + \sigma\hat{\sigma} + \nu\hat{\nu} - [1 - 2(1 - \sigma)(1 - \hat{\nu})][1 - 2(1 - \hat{\sigma})(1 - \nu)]$$

$$C: \sigma\hat{\nu}(1 - 2\hat{\sigma} - \nu) - \hat{\sigma}\nu(1 - 2\sigma - 2\hat{\nu})$$

$$D: (\hat{\sigma} - \nu)^2 - (\sigma - \hat{\nu})^2$$

4 熱伝導

前節で述べたように、加法的保存量を持つルールに対しては、平衡統計力学の標準的手法によって温度を導入することができた。さらにこのとき、系の両端に異なる温度の熱浴を取付けることによって、エネルギー輸送すなわち熱伝導を引き起こすことが可能になる。

熱浴は両端の変数を確率的に更新することによって表すことができる。具体的には、 N 個の格子点からなる系に対し、熱浴を表す格子点 0 と $N+1$ を加え、格子点 1 から N までの変数を式 (1), (2) に従って状態更新した後、格子点 0 と $N+1$ の変数は、条件付き確率

$$\mu_L(x_0|x_1) = \mathcal{N}_L \exp[-\beta_L F(x_0, x_1)] \quad (5)$$

$$\mu_R(x_{N+1}|x_N) = \mathcal{N}_R \exp[-\beta_R F(x_N, x_{N+1})] \quad (6)$$

に従って状態を選ぶものとする。ただしここで F は、表 1 のルールに対し $\alpha = 1$ の加法的保存量密度を 1 個選んだもので、それ以外の保存量は無視している。また、 β_L, β_R はそれぞれ左端、右端の熱浴の逆温度を表し、 $\mathcal{N}_L, \mathcal{N}_R$ は規格化定数である（一般にはそれぞれ x_1, x_N の関数となる）。このとき、系全体の状態が $\{x_i\} = (x_0, x_1, \dots, x_N, x_{N+1})$ から $\{x'_i\} = (x'_0, x'_1, \dots, x'_N, x'_{N+1})$ に遷移する確率は、

$$P(\{x'_i\}|\{x_i\}) = \mu_L(x'_0|x'_1) \mu_R(x'_{N+1}|x'_N) \prod_{i=1}^N \delta(x'_i, g(x_{i-1}, x_i, x_{i+1})) \quad (7)$$

($\delta(x, y)$ はクロネッカーのデルタ: $\delta(x, y) = 1$ for $x = y$, $\delta(x, y) = 0$ for $x \neq y$) で与えられ、分布関数 $\rho(\{x_i\})$ の時間発展演算子 T_* は P を用いて

$$T_* \rho(\{x_i\}) = \sum_{\{x'_i\}} P(\{x_i\}|\{x'_i\}) \rho(\{x'_i\}) \quad (8)$$

と表される。

熱浴であるための条件は、接触を続けていれば平衡状態が実現されるということであろう。上で与えた境界条件は、確かにこの要請を満足している。すなわち、両端の熱浴の温度が等しい $\beta_L = \beta_R = \beta$ の場合には、ギブス分布 $\rho_{eq}(\{x_i\}) = \mathcal{N}_{eq} \exp[-\beta \sum_{i=0}^N F(x_i, x_{i+1})]$ (\mathcal{N}_{eq} は規格化定数) が定常分布となる、つまり $T_* \rho_{eq} = \rho_{eq}$ であることを厳密に示すことができる。さらに、この状態への緩和が実現することが、数値的に確認されている。ただし、この熱浴は時間反転対称性を破っていることを注意しておく。

両端の熱浴の温度が異なる、 $\beta_L \neq \beta_R$ の場合を次に考えよう。定常分布が一意的である、すなわち任意の初期分布 ρ に対して $t \rightarrow \infty$ で $T_*^t \rho \rightarrow \rho_{ss}$ となることを仮定すれば、定常分布 ρ_{ss} は、

$$\rho_{ss} = \rho + \sum_{t=0}^{\infty} T_*^t (T_* - 1) \rho \quad (9)$$

と表される。ここで ρ の代わりに局所平衡分布

$$\rho_{le}(\{x_i\}) = \mathcal{N}_{le} \prod_{i=0}^N \exp[-\beta_i F(x_i, x_{i+1})] \quad (10)$$

(\mathcal{N}_{le} は規格化定数) を代入し、熱流 $j = N^{-1} \sum_{i=1}^N J(x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ の ρ_{ss} に関する平均を求め、温度勾配に関して展開して 1 次まで取ると、熱流が温度勾配に比例するというフーリエの法則

$$\langle j \rangle_{ss} = -\kappa \nabla T \quad (11)$$

と、熱伝導率 κ に関する久保公式

$$\kappa = \frac{1}{NT^2} \sum_{t=0}^{\infty} \langle \mathcal{J}(0) \mathcal{J}(t) \rangle_{eq} \left(1 - \frac{\delta_{t0}}{2} \right) \quad (12)$$

(ここで、 $\mathcal{J}(t) = \sum_i J(x_{i-1}^t, x_i^t, x_{i+1}^t)$ 、 $\langle \rangle_{eq}$ は平衡状態での平均を表す) が得られる。また、右辺の和の中で、時刻 $t=0$ の項が局所平衡分布からの寄与を表し、時刻 $t>0$ の項が局所平衡からのずれが寄与する部分を表す。

しかし、このような温度勾配に関する展開が許されるかどうかはまさに問題となる点であり、このことは時間発展のルールに大いに依存する。この点に関する一般的な理論は存在しない。したがって、実際にどのような振る舞いを示すかは、シミュレーションを行なってみなければ分からないことである。

5 シミュレーション

表1の7個のルールとそれぞれの $\alpha=1$ 加法的保存量に対し、式(1)、(2)、(5)、(6)で与えられる時間発展を実行することによって数値実験を行なった。局所平衡の保証もない非平衡状態なので、温度の定義から考え直す必要があるが、我々は局所的な温度として以下のような操作的な定義を採用する。 $\alpha=1$ 保存量は最近接相互作用のエネルギーを表すので、ボンドがエネルギーを担う。そこでボンド $(i, i+1)$ における温度 $T_i = \beta_i^{-1}$ を、ボンド $(i, i+1)$ でのエネルギーの時間平均 $\phi_i = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T F(x_i^t, x_{i+1}^t)$ から、エネルギーと温度に関する平衡の関係式(これは平衡統計力学の計算から得られる)を用いて決める。

フーリエの法則(11)の成立・不成立を見るにはいろいろな測定が考えられるが、これまでに行なったのは、

- (i) 大域的な温度勾配は形成されるか。またそのサイズ依存性はどうか。(系を大きくしたとき残るのか消えるのか。)
- (ii) 温度勾配が形成される場合、ある大きさの系で、両端の温度を変えたとき、式(11)のような熱流と温度勾配の比例関係は(温度勾配が小さい極限で)確かに成立しているか。
- (iii) 式(11)が成り立つならば $N(j)_{ss}$ は両端の温度だけで決まり、系の大きさ N に依存しない量になるはずだが、 N が大きいときにそのようになっているか。
- (iv) 熱伝導率に対する久保公式(12)は成立するか。
- (v) 局所平衡はどれくらい良く成り立っているか。すなわち、相対エントロピーで測ったときの局所平衡分布と定常分布のずれは、系を大きくしたとき小さくなるのか大きくなるのか。

以上5項目である。(i) から (iv) までは順に厳しいテストになっている[5]。

測定の詳細についてはいろいろなところで報告しているので、ここでは結果だけを述べよう。ルールごとの振る舞いは次のようになった。

26R, 94R: 大域的な温度勾配を形成し、熱流は系が大きいときフーリエ則に従い、熱伝導率は久保公式による値と一致する。定常分布は系を大きくすると局所平衡分布に近づく。

77R: 系が小さいときは大域的な温度勾配が形成されるが、熱流はフーリエ則には従わず、温度勾配ではなく両端の熱浴の温度差に比例して変化する。局所平衡からのずれが局所的にも残る。

91R, 123R: 境界付近で温度勾配が見られるが、内部に向かって指数関数に近い形で急速に勾配は消滅する。熱流は熱浴の温度差に比例。

95R, 90R: ほほ完全に平らな温度分布を示し、温度勾配は誤差の範囲内で 0。(90R では 0であることを証明できる。) 熱流は熱浴の温度差に比例。

以上 4 種類に分類したが、ルール 26R、94R とその他のルールの間には明確なギャップがあるが、それ以外は単に定量的な差である可能性もある。前者 (26R、94R の振る舞い) を拡散的挙動、後者を弾道的挙動と呼ぶことにしよう。

6 ボルツマン型方程式とルール混合

前節の結果と表 1 を対照してみると、ルール 26R と 94R という、加法的保存量を 1 個しか持たないルールだけがフーリエ則を満たしているということに気づく。そこで、他の保存量が存在することによる効果を取り除くことを考えてみよう。これは、局所的な分布関数の時間発展を記述する、ボルツマン型の方程式を考えることにより行なうことができる。

まずボルツマン型の方程式を導く。格子点 i から $i+\gamma$ までの $\gamma+1$ 個の格子点上の変数の確率分布を $P_{\gamma,i}(x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+\gamma})$ とし、力学変数ではなくこの分布関数の時間発展を考えると、リウヴィル方程式 (8) より

$$\begin{aligned} P_{\gamma,n}^{t+1}(x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+\gamma}) \\ = \sum_{x'_{n-1}, \dots, x'_{n+\gamma+1}} \prod_{i=n}^{n+\gamma} \delta(x_i, g(x'_{i-1}, x'_i, x'_{i+1})) P_{\gamma+2,n-1}^t(x'_{n-1}, x'_n, \dots, x'_{n+\gamma+1}) \end{aligned}$$

となり、 $(\gamma+1)$ 体の分布関数の時間発展を決めるためには $(\gamma+3)$ 体の分布関数が必要であるという BBGKY 階級方程式が得られる。そこで、

$$\begin{aligned} P_{\gamma+2,n-1}^t(x'_{n-1}, x'_n, \dots, x'_{n+\gamma+1}) \\ \cong P_{\gamma,n-1}^t(x'_{n-1} | x'_n, \dots, x'_{n+\gamma+1}) P_{\gamma,n}^t(x'_n, \dots, x'_{n+\gamma}) P_{\gamma,n+1}^t(x'_{n+\gamma+1} | x'_{n+1}, \dots, x'_{n+\gamma}) \end{aligned}$$

($P_{\gamma,m}^t(x_m | x_{m+1}, \dots, x_{m+\gamma+1})$ は条件 $x_{m+1}, \dots, x_{m+\gamma+1}$ の下で x_m を取る条件付き確率を表す。) というデカップリング近似を行なうと、 $i = 1, 2, \dots, N-\gamma$ に対しては

$$\begin{aligned} P_i^{t+1}(x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+\gamma}) \\ = \sum_{x'_{i-1}, \dots, x'_{i+\gamma+1}} \frac{P_{i-1}^t(x'_{i-1}, \dots, x'_{i+\gamma-1}) P_i^t(x'_i, \dots, x'_{i+\gamma}) P_{i+1}^t(x'_{i+1}, \dots, x'_{i+\gamma+1})}{\sum_a P_{i-1}^t(a, x'_i, \dots, x'_{i+\gamma-1}) \sum_b P_{i+1}^t(x'_{i+1}, \dots, x'_{i+\gamma}, b)} \\ \times \prod_{j=i}^{i+\gamma} \delta(x_j, g(x'_{j-1}, x'_j, x'_{j+1})) \end{aligned} \quad (13)$$

これまでの結果をまとめると次のように言うことができる。すなわち、ERCA においてフーリエの法則が成立するのは保存量が1個だけの場合に限る。加法的保存量が2個以上存在する場合には、一方が他方の量の拡散的振る舞いに対し障害として働く。別の言い方をすれば、保存量が1個の場合には、フーリエの法則のような拡散的挙動がかなり普遍的に成り立つということになる。

しかし、この段階ではまだ、数値実験の結果のまとめとしてそういうことがいえるというだけであり、では他の保存量はどのようにしてフーリエ則に対する障害として働くのか、保存量が1個の場合のフーリエ則の普遍性の起源は何か、という新たな疑問が生ずる。実際、定常状態ではなく、ボルツマン近似での緩和の様子を調べてみると、定常状態では弾道的でありながら拡散に近い緩和の振る舞いを示す場合も存在する。ここで得られた知見に対する一般性の確認や理論的裏付けは今後の問題である。

7 エントロピーの増大について

最後に、研究会で議論のあった、エントロピーの増大に関する数値実験の結果について報告しよう。

周期的境界条件の系を考え、初期には系の半分はエネルギー（加法的保存量）最低の状態（真空）にあり、もう半分はランダムに選ばれた状態にあったとしよう。この状態から時間発展させることを考えると、これは箱を半分に仕切って片方を真空、もう片方に気体を入れ、時刻 $t=0$ で仕切りを外すという、統計力学の教科書に必ず出てくる思考実験をセルオートマトンに置き換えたものだということができる。

このとき、時刻 t における空間的測度論的エントロピー

$$S_\mu = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{S_m}{m} = \lim_{m \rightarrow \infty} (S_{m+1} - S_m) \quad (17)$$

ただし、

$$S_m = - \sum_{x_1, \dots, x_m} P(x_1, \dots, x_m) \log P(x_1, \dots, x_m) \quad (18)$$

$$P(x_1, \dots, x_m) = \frac{1}{N} \sum_i \prod_{j=i}^{i+m-1} \delta(x_j, x_j^t) \quad (19)$$

を考えると、これは系が平衡状態に緩和するならば

$$P(x_1, \dots, x_m) \rightarrow \frac{1}{Z_m} \exp[-\beta \sum_i F(x_i, x_{i+1})] \quad (20)$$

となるから、 $t \rightarrow \infty$ で熱力学的エントロピーに収束するはずである。

$$S_\mu \rightarrow S = \beta(\phi - f_1) \quad (21)$$

ここに、 S 、 f_1 はそれぞれ格子点当たりの熱力学的エントロピーと自由エネルギーを表す。

$$f_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N\beta} \log \sum_{\{x_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}_N(\{x_i\})}$$

例えば表1の保存量 D に対しては

$$S = \log \frac{4}{1-\phi^2} + \phi \log \left(\frac{1-\phi}{1+\phi} \right) \quad (22)$$

である。

では、この緩和の挙動はどのようなになるだろうか。 $N = 10^5$ の系を用いて、 $t = 10^6$ まで時間発展を行なわせた結果を図3に示す。これらのグラフは $S_{m+1} - S_m$ ($m = 1, 2, 3, 4$) の時間発展を表す。不等式

$$S_{m+2} - S_{m+1} \leq S_{m+1} - S_m \quad (23)$$

より、どの線がどれを表すかがわかる。

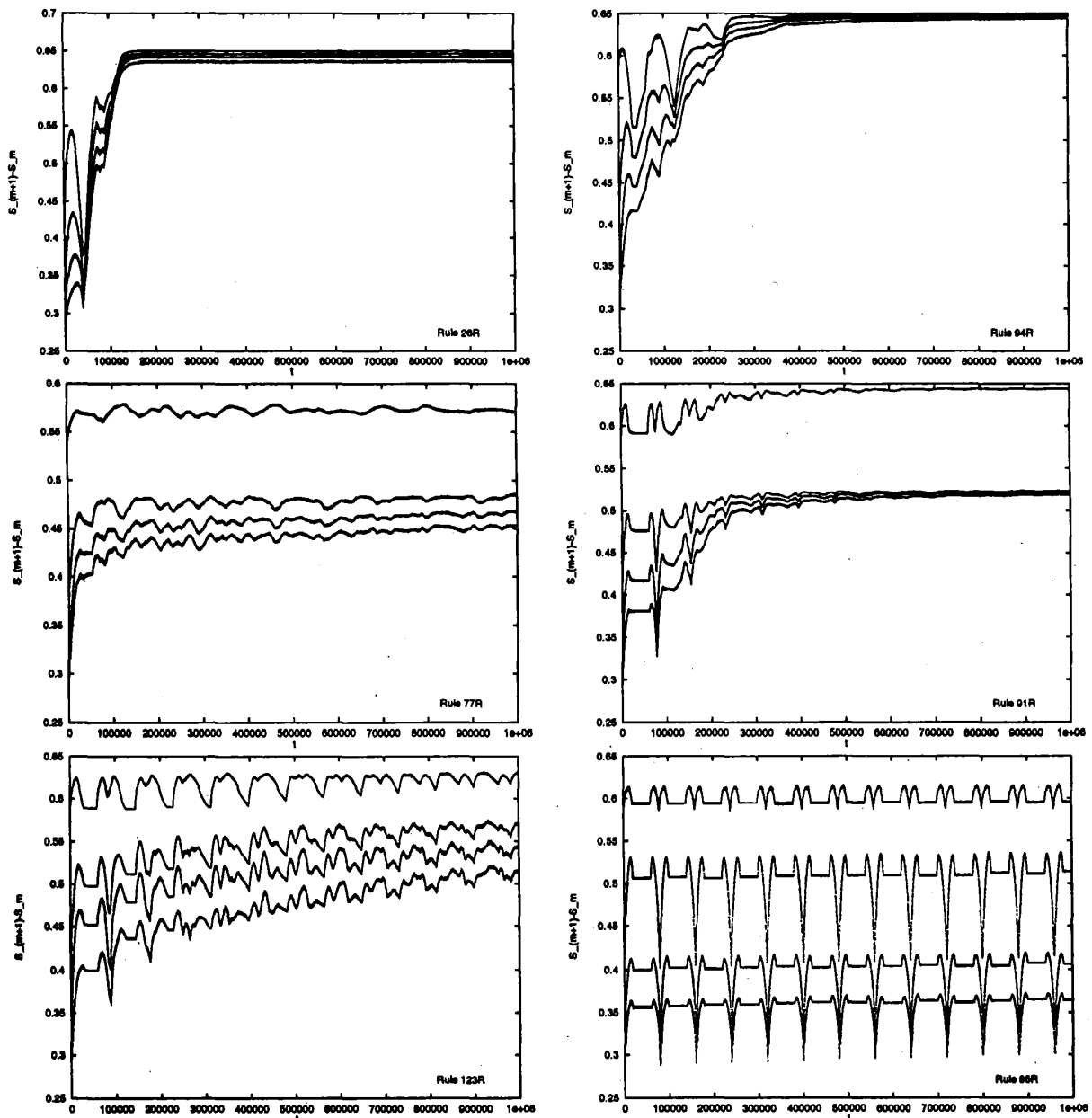


図3：エントロピーの増大。ルール 26R、77R 以外はすべて保存量 D に対する結果

これで見ると、ルール 95R 以外は緩和時間の大小はあるもののエントロピー増大の傾向が現れているが、ルール 77R や 123R では細かい振動が収まらないように見える。これと対照的に、拡散的挙動を示すルール (26R、94R) では m の増大と共に単調増加に近づいており、緩和後も一

定値にとどまっている。この値は、熱力学エントロピーの値と一致している。ひとつのサイズの系に対する結果だけであり、結論をくだすのは早計であるが、エントロピーの振る舞いの「素直さ」と拡散的振る舞いとの間に相関があることが予想される。研究会で議論になったのはこの曲線がフラクタルであるかどうかという点であったが、これについてはあまり肯定的な結果とは言えないようである。ひとつの可能性としては、フラクタル構造を見るためにはもっとずっと大きな規模のシミュレーションを必要とするのかもしれない。あるいは、このセルオートマトンの系では、局所的なエネルギーが動く速度は有限個に限られているので、フラクタル構造が現れないのかもしれない。いずれにせよ、さらなる数値計算の結果が必要と思われる。

参考文献

- [1] 田崎秀一、「多重パイコね変換における非平衡状態とフラクタル測度」(本報告集)
- [2] S. Tasaki and P. Gaspard, "Fick's Law and Fractality of Nonequilibrium Stationary States in a Reversible Multibaker Map," submitted to J. Stat. Phys.
- [3] H. Kaburaki and M. Machida, "Thermal conductivity in one-dimensional lattices of Fermi-Pasta-Ulam type," Phys. Lett. **A181** (1993) 85-90.
- [4] T. Hattori and S. Takesue, "Additive Conserved Quantities in Discrete-Time Lattice Dynamical Systems," Physica D **49** (1991) 295.
- [5] S. Takesue, "Fourier's Law and the Green-Kubo Formula in a Cellular-Automaton Model," Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 252.